

最小2乗法の応用

1 さまざまな関数への最小2乗法の応用

1.1 無理関数

実験結果をグラフにプロットしてその大体の形を見たとき、直線的な変化を示していれば、前節までの単純な最小2乗法が適用できる。しかし、直線上にのらないデータ列の場合には工夫が必要である。例えば、データが関係式

$$y = ax^b$$

の関係にあると推測される場合、両対数グラフにプロットしなおしてみることで解決する場合もある。上式の両辺の常用対数を取ると、

$$\log_{10} y = \log_{10} a + b \log_{10} x$$

となるので、 $x' \equiv \log_{10} x$, $y' \equiv \log_{10} y$ とおくと、

$$y' = \log_{10} a + bx'$$

となり、直線関係に直せる。なので、対数を取った値で前節のように最小2乗法を用いることで、係数を求めることができる。ここで、注意することは、直線関係にならない場合でもこの無理関数系に従うこともあるということである。図1に示すのは、以下の関数を通常のプロットであらわしたものである。(a)は通常のプロットであるが、(b)は両対数でプロットしてある。しかしながら、 x の小さい値の領域で直線ではなくなっている。このように曲がるときは、以下の式のように $(x+a)^b$ のようになっていることが推測されるので、最小2乗法を使う際には式の形に注意する。曲線の曲がり方が逆の方向の場合には $(x-a)^b$ と考えられる。

$$y = 2(x+3)^{2.3}$$

1.2 指数関数

データに指数関数的な依存関係があると推測されるとき、すなわち、

$$y = ae^{bx}$$

の関係があるときには、先ほどとは少し異なる。両辺の常用対数を取ると、

$$\begin{aligned} \log_{10} y &= \log_{10} a + bx \log_{10} e \\ &= \log_{10} a + (\log_{10} e)bx \end{aligned}$$

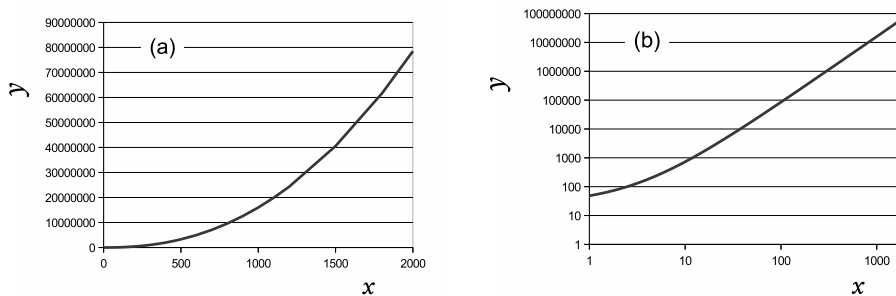


図 1: $y = 2(x+3)^{2.3}$ のグラフ。線形プロット (a) と両対数プロット (b)。

となり、片対数グラフでプロットすると直線となる。前節と同様に、 x の小さい領域で直線から外れて曲率を持つようであると $y + \alpha = ae^{bx}$ の形の可能性がある。

1.3 べき級数

測定結果の理論的な背景が見えない時には、どのような関数形で最小 2 乗法を使うべきか判断するのが難しい。何らかの数式化を行いたい場合には多項式、

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$$

の形で表せることもある。項数を増やしていくとフィッティングできる可能性が増えるが、計算が複雑になるだけでなく、背景の解釈も難しくなるために、一般的には 3 次くらいまでしておくべき、というように言われている。

演習

授業中に配布する資料に基づいていくつかのケースについて確認する作業を行う。

べき級数の実際の応用例

磁場が電気伝導に及ぼす効果の一つに「ホール効果」がある。通常は外部磁場によって電子の運動に変化が起き、それを電流と垂直方向のホール電圧として測定するものが知られており、キャリアの電荷の正負（電子伝導かホール伝導か）を見ることや磁場センサとして用いられている。材料内部の磁気モーメントにより生じるものは「異常ホール効果」と呼ばれ、材料中の伝導電子の散乱機構に関与しているが、これは大きく分けてスキュー散乱かサイドジャンプ機構かに分類される。

ホール係数の温度変化が導電率の温度変化の 1 乗に比例する場合はスキュー散乱、2 乗に比例する場合にはサイドジャンプによるとされているが、実験によりその機構を明らかにする際には、厳密には最小 2 乗法が用いられるが、本日の内容のように両対数グラフにプロットして傾きを求めることでも散乱機構を知ることができる。